



TITLE:

電気伝導計算のノート(特別企画)

AUTHOR(S):

中野, 藤生

CITATION:

中野, 藤生. 電気伝導計算のノート(特別企画). 物性研究 2005, 84(2): 215-222

ISSUE DATE:

2005-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110177>

RIGHT:

電気伝導計算のノート

名大教養部 中 野 藤 生

(1955 年 9 月 12 日 受理)

§1.

先にかいた「ひとつの電気伝導計算法」¹⁾においては久保、富田の論文²⁾にひきずられすぎで寝マネになったクライがあり、そのため生じた議論の不必要なアイマイさが気になるまゝしばらくすてゝあつた。さいわい名古屋にゐた Feynman 教授が同様な計算を手がけておられ、短時間であつたが有益な討論で啓発されたのがキツカケとなつて話が少し明瞭になつた。一つは前の時から感じとしては考えておつたことであるが、*high frequency part* をねぐることはキツチリ正確なことであるということ。もう一つは *Grüneisen* の式を出すこと。前に高温抵抗を出しただけだつたのはウカツだつた。基研の集りの時、久保さんのお教示をおねがひしたおり、この式が出るはずと久保さんがいわれた。リバプールからテガミもいたゞいて、中嶋さんもこの計算をやつたということを知つた。その後、糟谷さんとの討論で *Winkler* に裏連してあとで §5 で述べることを考えようとしはじめたが、なまけているうち中嶋さんの計算が有山先生のところに届いたので、これと並列に I 以後に考えたことをかくことにした。

§2.

I の (8) 式の変形をやる。即ち

$$\varphi_{\nu\mu}(t) = \int_0^\beta d\lambda \langle e^{\lambda\mathcal{H}} j_\nu e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t) \rangle \quad (1)$$

I (8) 式で積分の前の $\frac{1}{\mathcal{C}}$ は余計であつた。 \mathcal{H} は電場のないときの系のハミルトニアン

$$\mathcal{H} \psi_n = E_n \psi_n \quad (2)$$

と、 \mathcal{H} の固有函数。その固有値を ψ_n, E_n とする。

$$\varphi_{\nu\mu}(t) = \int_0^\beta d\lambda \text{Tr} \left(e^{(\beta-\lambda)\mathcal{H}} j_\nu e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t) \right) / \text{Tr} (e^{-\beta\mathcal{H}})$$

とこで

$$\int_0^\beta \text{Tr} \left(e^{(\beta-\lambda)\mathcal{H}} j_\nu e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t) \right) d\lambda$$

(54)

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\beta \text{Tr} (e^{-\lambda \mathcal{H}} j_\mu(t) e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\nu) d\lambda \quad \beta-\lambda \rightarrow \lambda \text{ と積分変数をかえて} \\
&= \int_0^\beta \text{Tr} (e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\mu(t) e^{-\lambda \mathcal{H}} j_\nu) d\lambda \\
&= \frac{1}{2} \int_0^\beta \text{Tr} (e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\nu e^{-\lambda \mathcal{H}} j_\mu(t) + e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\mu(t) e^{-\lambda \mathcal{H}} j_\nu) d\lambda
\end{aligned}$$

となり。これは(2)を使うとさらに

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\lambda \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} e^{\lambda(E_m-E_n)} (j_{\nu mn} j_{\mu nm} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t} \\
&\quad + j_{\mu mn} j_{\nu nm} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t}) \\
&= \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_m - E_n} \text{Re} [j_{\nu mn} j_{\mu nm} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t}] \\
&\quad \text{Tr}(e^{-\beta \mathcal{H}}) = \sum_n e^{-\beta E_n} \\
\therefore \varphi_{\nu\mu}(t) &= \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_m - E_n} \text{Re}(j_{\nu mn} j_{\mu nm} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t}) / \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (3)
\end{aligned}$$

よって

$$\varphi_{\mu\mu}(t) = \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_m - E_n} |j_{\mu mn}|^2 \cos\left(\frac{E_m - E_n}{\hbar} t\right) / \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (4)$$

電気伝導度 σ は

$$\begin{aligned}
\sigma &= \int_{-\infty}^t \varphi_{\mu\mu}(t-t_0) dt_0 = \int_0^\infty \varphi_{\mu\mu}(\tau) d\tau \\
&= \pi \hbar \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_m - E_n} |j_{\mu mn}|^2 \delta(E_m - E_n) / \sum_n e^{-\beta E_n} \\
&= \frac{\pi \hbar}{kT} \sum_n e^{-\beta E_n} \sum_m |j_{\mu mn}|^2 \delta(E_m - E_n) / \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (5)
\end{aligned}$$

Feynman 教授は完全に exact な式をえたといわれたが。この式のことである。(5)式を前と同じように次のように取扱う。

$$\sigma = \frac{1}{kT} \int_0^\infty \chi(t) dt. \quad (6)$$

-(55)-

$$\chi(t) = \frac{1}{2} \left\langle \left(e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} j_{\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} + e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} j_{\mu} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \right) j_{\mu} \right\rangle \quad (6')$$

Iと同じく

$$\langle X \rangle = \text{Tr} (X e^{-\beta \mathcal{H}}) / \text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}})$$

を用いている. $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$, \mathcal{H}_0 は自由な電子と自由な格子波とのハミルトニアン, \mathcal{H}' は両者の相互作用のハミルトニアンとして,

$$\begin{aligned} j_{\mu}(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} j_{\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} j_{\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 [\mathcal{H}'(t_1), j_{\mu}] \\ &\quad + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\mathcal{H}'(t_1), [\mathcal{H}'(t_2), j_{\mu}]] + \dots \end{aligned} \quad (6'')$$

のような展開を行い, $\langle X \rangle$ を $\langle X \rangle_0$:

$$\langle X \rangle_0 = \text{Tr} (X e^{-\beta \mathcal{H}_0}) / \text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}_0}) \quad (6''')$$

でおきかえる. このとき \mathcal{H}_0 としてはフリコミの操作によつて十分キモノをきせられた電子及び格子波フォノンのハミルトニアンをとるべきで \mathcal{H}' はその残りである両者の相互作用であるようにとつておくべきである. $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$ は始めからそのように操作された後のものと考へておく. やゝ余談にわたるが, \mathcal{H}_0 と \mathcal{H}' との形の精密な議論が, 最近 Bardeen と Pines とによつてなされている.³⁾ 結論は従来とられているものが妥当だということになるのだけれど, Bohm-Pines の例の plasma の方法を使つて論ずるわけで, plasma の方法の主要な成果はマジメに考えるとズボラにみえる従来の取扱ひも偶然が必要か大過ないものであることを示した点にあると思うけれど, この場合もそういうことを示したわけである.

(6')に(6'')をいれ, (6''')を使うと,

$$\begin{aligned} \chi(t) &= \langle j_{\mu}^2 \rangle + \frac{i}{\hbar} \sum_{\omega} \langle [\mathcal{H}'_{\omega}, j_{\mu}] j_{\mu} \rangle \int_0^t \cos(\omega t_1) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega} \langle [\mathcal{H}'_{\omega}, [\mathcal{H}'_{-\omega}, j_{\mu}]] j_{\mu} \rangle \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cos \omega(t_1 - t_2) \\ &= \langle j_{\mu}^2 \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega} \langle [\mathcal{H}'_{\omega}, [\mathcal{H}'_{-\omega}, j_{\mu}]] j_{\mu} \rangle \int_0^t d\tau (t - \tau) \cos(\omega \tau) \end{aligned}$$

この式もふくめて以後 $\langle \dots \rangle$ を単に $\langle \dots \rangle$ とかいた. \mathcal{H}'_{ω} 等のイミはIと同じで,

-(56)-

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} \mathcal{H}' e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t} = \sum_{\omega} \mathcal{H}'_{\omega} e^{i\omega t}$$

上の式を

$$\chi(t) = \langle j^2 \rangle \left\{ 1 - \int_0^t d\tau (t-\tau) f(\tau) \right\} \quad (7)$$

$$f(\tau) = \frac{1}{\hbar^2 \langle j_{\mu}^2 \rangle} \sum_{\omega} \langle [\mathcal{H}'_{\omega} [\mathcal{H}'_{-\omega}, j_{\mu}]] j_{\mu} \rangle \cos(\omega\tau) \quad (7')$$

とかく.

$$\chi(t) = \langle j_{\mu}^2 \rangle e^{\psi(t)} \quad (8)$$

$$t \rightarrow \infty : \psi(t) \sim -\nu t \quad (8')$$

を仮定すると

$$\begin{aligned} \nu &= \int_0^{\infty} f(\tau) d\tau = \frac{\pi}{\hbar^2 \langle j_{\mu}^2 \rangle} \sum_{\omega} \langle [\mathcal{H}'_{\omega} [\mathcal{H}'_{-\omega}, j_{\mu}]] j_{\mu} \rangle \delta(\omega) \\ &= \frac{\pi}{\hbar^2 \langle j_{\mu}^2 \rangle} \sum_{\omega} \langle [\mathcal{H}'_{\omega}, j_{\mu}] [j_{\mu}, \mathcal{H}'_{-\omega}] \rangle \delta(\omega) \end{aligned} \quad (8'')$$

こゝでは *high frequency part* をねぐるような近似はいらぬ.

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{kT} \int_0^{\infty} \chi(t) dt = \frac{\langle j_{\mu}^2 \rangle}{kT} \int_0^{\infty} e^{-\nu t} dt \\ &= \frac{\langle j_{\mu}^2 \rangle}{\nu kT} = \frac{\hbar^2 \langle j_{\mu}^2 \rangle}{\pi kT} \frac{1}{\sum_{\omega} \langle [\mathcal{H}'_{\omega}, j_{\mu}] [j_{\mu}, \mathcal{H}'_{-\omega}] \rangle \delta(\omega)} \end{aligned} \quad (9)$$

§3.

 $\mathcal{E}_K = \frac{\alpha}{2} K^2$ を仮定して (9) を計算する.

$$j_{\mu} = -\frac{e}{\hbar} \sum_K \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial K_{\mu}} a_K^* a_K = -\frac{\alpha e}{\hbar} \sum_K K_{\mu} a_K^* a_K$$

$$\begin{aligned} \langle j_{\mu}^2 \rangle &= \left(\frac{\alpha e}{\hbar} \right)^2 \left\langle \sum_K K_{\mu} a_K^* a_K \sum_{K'} K'_{\mu} a_{K'}^* a_{K'} \right\rangle \\ &= \left(\frac{\alpha e}{\hbar} \right)^2 \left\langle \sum_K K_{\mu} a_{\mu}^* a_K \right\rangle^2 + \left(\frac{\alpha e}{\hbar} \right)^2 \left\{ \left\langle \sum_K K_{\mu}^2 (a_K^* a_K)^2 \right\rangle \right. \\ &\quad \left. - \sum_K \langle K_{\mu}^2 a_K^* a_K \rangle \right\} \end{aligned}$$

-(57)-

$$\begin{aligned}
&= 0 + \left(\frac{\alpha e}{\hbar}\right)^2 \left\{ \sum_{\mathbf{k}} K_{\mu}^2 (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^2) \right\} \\
&= - \left(\frac{\alpha e}{\hbar}\right)^2 kT \sum_{\mathbf{k}} K_{\mu}^2 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} = - \frac{1}{3} \left(\frac{e}{\hbar \pi}\right)^2 \alpha kT \int_0^{\infty} K^3 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \\
&= \frac{1}{3} \left(\frac{e}{\hbar \pi}\right)^2 kT K_0^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial K}\right)_0.
\end{aligned}$$

$$f_{\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{kT}} + 1}$$

K_0 : Fermi 準位の波数の 2π 倍.

$$K_0^3 = 3\pi^2 n \quad (n: \text{単位体積中の電子数})$$

$$[j_{\mu}, \mathcal{H}'_{\omega}] = -A\alpha \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{k} k_{\mu} a_{\mathbf{k}+\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + A\alpha \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{k} k_{\mu} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}} = \hbar\omega \quad \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}} = -\hbar\omega$$

$$A = \left(\frac{2\pi C^2}{9NMS}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{e}{\hbar}$$

M : イオンの質量, N : 単位体積中のイオンの数, S : 音速.

C : Sommerfeld - Bethe の常数

$$\therefore \sum \langle [j_{\mu}, \mathcal{H}'_{\omega}] [\mathcal{H}'_{-\omega}, j_{\mu}] \rangle \delta(\omega)$$

$$= A^2 \alpha^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}} k k_{\mu}^2 [f_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} (1-f_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}+1) + f_{\mathbf{k}} (1-f_{\mathbf{k}+\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}}] \delta(\omega)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}} = \pm \hbar\omega$$

$$= A^2 \alpha^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}} k k_{\mu}^2 [f_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} (1-f_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}+1) + f_{\mathbf{k}} (1-f_{\mathbf{k}+\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}}] \delta\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar} - \omega_{\mathbf{k}}\right)$$

$$= 2A^2 \alpha^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}} k k_{\mu}^2 (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}+1) n_{\mathbf{k}} \delta\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar} - \omega_{\mathbf{k}}\right)$$

$$\begin{aligned}
&= 2A^2 \alpha^2 \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} K^2 dK \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{K_0} k^2 dk \int_{-1}^1 d(\cos\theta) k k_{\mu}^2 (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{k}}) \\
&\quad \times (n_{\mathbf{k}}+1) n_{\mathbf{k}} \delta\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar} - \omega_{\mathbf{k}}\right)
\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar A^2}{6\pi^4} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon \int_0^{K_0} k^4 dk \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial T}{\partial S}\right) \cdot \frac{\partial n_{\mathbf{k}}}{\partial k}$$

-(58)-

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{\hbar A^2}{6\pi^4} \int_0^{k_0} k^5 \frac{\partial n_k}{\partial k} dk \\
 &= \frac{4\pi^2 c^2 e^2 N}{3M} F\left(\frac{\Theta}{T}\right) \qquad n_k = \langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar^2 k^2}{2mT}} - 1} \\
 &F(x) = x^{-6} \int_0^x y^5 \frac{e^y}{(e^y - 1)^2} dy
 \end{aligned}$$

これらを(9)にいれると

$$\sigma = \frac{\nu e^2 M s k_0 K_0 \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial K}\right)_0}{4\pi^3 \hbar^2 c^2 \Phi\left(\frac{\Theta}{T}\right)} \quad (10)$$

$$\Phi(x) = x^{-5} \int_0^x \frac{y^5 e^y}{(e^y - 1)^2} dy \quad (10')$$

添字0は Fermi 準位での値、又は格子波の切断波数における値をいみする。νは1原子あたりの電子数、

$$\nu = n/N$$

かくて Grüneisen の式をえた。

$$\Phi(x) \approx \begin{cases} \frac{1}{4} x^{-1} & (x \ll 1), \\ 120 \zeta_5 x^{-5} & (x \gg 1), \end{cases} \quad \zeta_5 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^5}$$

故

$$\sigma = \begin{cases} \frac{\nu e^2 M s k_0 K_0 \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial K}\right)_0}{480 \pi^3 \hbar^3 c^2 \zeta_5} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^5, & (T \ll \Theta) \\ \frac{\nu e^2 M s k_0 K_0 \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial K}\right)_0}{\pi^3 \hbar^2 c^2} \frac{\Theta}{T} & \end{cases} \quad (11)$$

§4

ついでに交流電場の場合の計算もかいておく。

$E(t) = E \cdot \cos(\nu t)$ がかゝるときの系の電流密度は

$$J(t) = \text{Re} \left[E \int_{-\infty}^t \varphi_{\mu\mu}(t-t_0) e^{i\nu t_0} dt_0 \right]$$

-(59)-

$$\begin{aligned}
&= \mathcal{R}e \left[E(t) \int_0^\infty \gamma_{\mu\mu}(\tau) e^{-i\nu\tau} d\tau \right] \\
&= \mathcal{R}e \left[E(t) \sum_{n,n} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_m - E_n} |j_{mn}|^2 \int_0^\infty \cos\left(\frac{E_m - E_n}{\hbar} \tau\right) e^{-i\nu\tau} d\tau \right] \\
&= \frac{1}{kT} \mathcal{R}e \left[E(t) \int_0^\infty d\tau \chi(\tau) e^{-i\nu\tau} \right]
\end{aligned}$$

(8) (8a) (8b) を使うと, §2で $\alpha\nu$ を ν_0 とかいて

$$\begin{aligned}
J(t) &= \frac{1}{kT} \mathcal{R}e \left[E(t) \int_0^\infty d\tau \langle j_\mu^2 \rangle e^{-\nu_0\tau - i\nu\tau} \right] \\
&= \frac{\langle j^2 \rangle}{kT} \frac{E}{\nu_0^2 + \nu^2} \left\{ \nu_0 \cos(\nu t) + \nu \sin(\nu t) \right\} \quad (12)
\end{aligned}$$

$$\tilde{E}(t) = E \cdot e^{i\nu t}, \quad E(t) = \mathcal{R}e \tilde{E}(t), \quad J(t) = \mathcal{R}e \tilde{J}(t)$$

なるものを考えると,

$$\tilde{J}(t) = \tilde{\sigma} \tilde{E}(t)$$

$$\tilde{\sigma} = \frac{\langle j_\mu^2 \rangle}{kT} \frac{e^{-i\eta}}{\sqrt{\nu_0^2 + \nu^2}} \quad (12')$$

$$\eta = \chi_g^{-1} \frac{\nu}{\nu_0}$$

と表わせる.

§5.

Umklapp を考えにいれないと, δ 函数的なパルス電場をかけた後, 系の全運動量は保存し, 長時間の後でも電流がきえないはずで, (8) (8') のように仮定することは文字どおりにはよくないと思われる. この問題については又いづれ考えてみたい. 今は物理的にみて, (8), (8') を仮定することは許されることだと考えておく.

Feynman 教授との討論の機会をつくつてくださった有山先生, 討論して下さったS研の皆さん, とくに有益でシンラッな批判をしていたゞく横谷さんに謝意を表する. 有益なご教示をいただいた久保さん, *Feynman* 教授, おテガミをいただいた中嶋さんにお礼申し上げる. 中嶋さんには, 酷暑にへばつていたまゝ, 返事をさぼってしまったことをおわびしたい.

-(60)-

文 献

- 1) 中 野, 物 研. 84. 25 (1955).
- 2) R. Kubo & K. Tomita, *Journ. Phys. Soc. Jap.* 9 (1954)
- 3) Bardeen & Pines, 中嶋さん宛名大に送つてきた手稿.